自動微分法を利用したRomberg積分の手間について(スーパーコンピュータのための数値計算アルゴリズムの研究)

戸田, 英雄; 小野, 令美; 伊理, 正夫

戸田, 英雄 ...[et al]. 自動微分法を利用したRomberg積分の手間について(スーパーコンピュータのための数値計算アルゴリズムの研究). 数理解析研究所講究録 1987, 613: 144-153

数理解析研究所講究録
613巻 1987年 144-153

自動微分法を利用した Romberg 積分の手間について

千葉大学工学部　戸田英雄 (Hideo Toda)
都立農芸高校　小野令美 (Harumi Ono)
東京大学工学部　伊理正夫 (Masao Iri)

1．まえがき

数値計算の分野で，微係数を用いて得られる手法は多い．しかし，微係数を求めるには，ある関数が与えられたときその導関数も別に与えなければならないことから，従来，微係数の使用は極力回避され，やむを得ず用いるときには数値微分で代用されてきた．数値積分公式についてみると，台形則は端点補正によって高精度公式が得られるが，微係数を伴うため，あまり行われず，微係数を差分で代用したものに Grerory の公式がある[3]．

しかし，伊理[1]，Rall[2] らによって提案されている自動微分法を用いれば，関数計算と同時に微係数がごく僅かの手間で得られるから，今や微係数の計算を回避する理由は全くない．数値積分公式に限らず微係数を取り入れた手法はもっと積極的に使われてよいと思われる．

そこで，微係数を用いて端点を補正した台形則から出発する Romberg 積分をとりあげ，その誤差と手間について解析を試みる．

2．補外法による公式

有限区間［a，b］における定積分

$\int_a^b f(x)\,dx$

の数値積分で，台形則および端点における微係数をとり入れた台形則に基づく Romberg 積分の誤差を考察する．ここで，f は閉区間［a，b］において必要な回数だけ微分可能とする．

台形則

$$T_{\nu,0}=h_\nu\{\frac{1}{2}f(a)+\Sigma_{j=1}^{N-1}f(a+jh_\nu)+\frac{1}{2}f(b)\},\ h_\nu=\frac{b-a}{2^\nu},\ N=2^\nu$$

は Euler-Maclaurin の公式を用いると

$$T_{\nu,0}-I=h_\nu^2\cdot\frac{B_2}{2!}\{f'(b)-f'(a)\}+h_\nu^4\cdot\frac{B_4}{4!}\{f^{(3)}(b)-f^{(3)}(a)\}+\cdots\cdots$$

と書ける．ここで B_{2j} は Bernoulli 数で，$B_2=1/6$, $B_4=-1/30$, ……である．一方 2k−1 次の微係数を含む項までとり入れた台形公式

$$D_{\nu,K}^{(K)}=T_{\nu,0}-\Sigma_{j=1}^{K}h_\nu^{2j}\cdot\frac{B_{2j}}{(2j)!}\{f^{(2j-1)}(b)-f^{(2j-1)}(a)\}$$

を考えると，台形則と同様に

$$D_{\nu,K}^{(K)}-I=h_\nu^{2K+2}\cdot\frac{B_{2K+2}}{(2K+2)!}\{f^{(2K+1)}(b)-f^{(2K+1)}(a)\}+\cdots\cdots$$

と書くことができる．

Richardson 補外を用いて $f^{(2n-1)}$ を含む項までを消去した公式を考える．台形則については，いわゆる Romberg 積分であり，$T_{0,0}$, $T_{1,0}$, …, $T_{n,0}$ を用いて $T_{n,n}$ まで補外すればよい．ここで

$$T_{j,d}=\frac{4^dT_{j,d-1}-T_{j-1,d-1}}{4^d-1},\quad (j=1,2,\cdots,n;\ d=1,2,\cdots,j)$$

である．2k−1 次の微係数を含む項までとり入れた台形公式については，誤差項の比較のために，$D_{0,K}^{(K)}$, $D_{1,K}^{(K)}$, …, $D_{m,K}^{(K)}$ を用いて $T_{n,n}$ と

同じ微係数を含む項のところまでの補外にとどめた $D_{m,n}^{(k)}$ を考察する．ここで　$m \geqq n-k$,

$$D_{j,d}^{(k)}=\frac{4^d D_{j,d-1}^{(k)}-D_{j-1,d-1}^{(k)}}{4^d-1},\ (j=1,\ 2,\ \cdots,\ m;\ d=k+1,\ k+2,\ \cdots,\ \min(n,\ j))$$

である．

両公式の補外の回数はそれぞれ

$T_{n,n}$ $\cdots$ $n(n+1)/2$ 回，　$D_{m,n}^{(k)}$ $\cdots$ $(n-k)(n-k+1)/2$ 回

である．

また，誤差の大きさはそれぞれ次のようになる．簡単のため $f^{(j)}(b)-f^{(j)}(a)$ を $F^{(j)}$ と略記すると，誤差の第１項と第２項はそれぞれ

$$T_{n,n}-I=(-1)^n 4^{n(n+1)/2} h_n^{2n+2}\frac{B_{2n+2}}{(2n+2)!}F^{(2n+1)}$$
$$+(-1)^n 4^{(n+1)(n+2)/2}\frac{1-4^{-(n+1)}}{3}h_n^{2n+4}\frac{B_{2n+4}}{(2n+4)!}F^{(2n+3)}+\cdots,$$

$$D_{m,n}^{(k)}-I=(-1)^n 4^{n(n+1)/2}\frac{3}{4-4^{n+1}}\cdot\frac{15}{4^2-4^{n+1}}\cdot\cdots\cdot\frac{4^k-1}{4^k-4^{n+1}}h_m^{2n+2}\frac{B_{2n+2}}{(2n+2)!}F^{(2n+1)}$$
$$+(-1)^n 4^{(n+1)(n+2)/2}\frac{3}{4-4^{n+2}}\cdot\frac{15}{4^2-4^{n+2}}\cdot\cdots\cdot\frac{4^k-1}{4^k-4^{n+2}}\cdot\frac{1-4^{-(n+1)}}{3}$$
$$\times h_m^{2n+4}\frac{B_{2n+4}}{(2n+4)!}F^{(2n+3)}+\cdots$$

である．

３．誤差の比較

両公式の誤差項の同じ部分を簡単のために K_j と略記する．すなわち

$$K_{2n+2}=(b-a)^{2n+2}\frac{B_{2n+2}}{(2n+2)!}F^{(2n+1)}$$

と書く．

$T_{n,n}$ と $D^{(k)}_{m,n}$ の誤差の主要項の大きさはそれぞれ

$$E_T=4^{-n(n+1)/2}K_{2n+2}\equiv c_T K_{2n+2},$$

$$E_D=4^{-n(n+1)/2}4^{(n-m)(n+1)}\frac{3}{4^{n+1}-4}\cdot\frac{15}{4^{n+1}-4^2}\cdot\cdots\cdot\frac{4^k-1}{4^{n+1}-4^k}K_{2n+2}$$

$$\equiv c_D K_{2n+2}$$

である．この c_T と c_D を比較すると，$m=n$ のとき，この比は

$$\frac{c_D}{c_T}=\frac{3}{4^{n+1}-4}\cdot\frac{15}{4^{n+1}-4^2}\cdot\cdots\cdot\frac{4^k-1}{4^{n+1}-4^k}\leqq 1,\quad (n\geqq k)$$

であり，$m=n-k$ のときには，この比は

$$\frac{c_D}{c_T}=\frac{3}{1-4^{-n}}\cdot\frac{15}{1-4^{-(n-1)}}\cdot\cdots\cdot\frac{4^k-1}{1-4^{-(n-k+1)}}$$

で1より大きいが，$k=1$ のとき n が 2 以上であれば c_Dは c_T の約3倍程度に過ぎない．

また，誤差の第2項の第1項に対する比の大きさは，それぞれ

$$\lambda_T=\frac{4}{3}\left(1-\frac{1}{4^{n+1}}\right)\frac{K_{2n+4}}{K_{2n+2}},$$

$$\lambda_D=\frac{4}{3}4^{n+1-m}\left(\frac{1}{4^{k+1}}-\frac{1}{4^{n+2}}\right)\frac{K_{2n+4}}{K_{2n+2}}=\frac{4}{3}\cdot 4^{n-k-m}\left(1-\frac{1}{4^{n+1-k}}\right)$$

である．$k\geqq 1$，$m\geqq n-k$ から

$$4^{n-k-m}\leqq 1,\quad 1-\frac{1}{4^{n+1-k}}<1-\frac{1}{4^{n+1}}$$

なので，常に $\lambda_D<\lambda_T$ が成り立つ． すなわち，主要項による誤差の見積りは $T_{n,n}$ より $D^{(k)}_{m,n}$ に対してよりよい結果を与えている．

Table 1 Derivatives for basic operations

w	$\frac{dw}{dt}$	$\frac{d^2w}{dt^2}$	$\frac{d^3w}{dt^3}$	operation counts: w	$w, \frac{dw}{dt}$	$w, \frac{dw}{dt}, \frac{d^2w}{dt^2}$	$w, \frac{dw}{dt}, \frac{d^2w}{dt^2}, \frac{d^3w}{dt^3}$
$u \pm v$	$\frac{du}{dt} \pm \frac{dv}{dt}$	$\frac{d^2u}{dt^2} \pm \frac{d^2v}{dt^2}$	$\frac{d^3u}{dt^3} \pm \frac{d^3v}{dt^3}$	1A	2A	3A	4A
$u \cdot v$	$\frac{du}{dt} \cdot v + u \cdot \frac{dv}{dt}$	$\frac{d^2u}{dt^2} \cdot v + 2\frac{du}{dt}\frac{dv}{dt} + u\frac{d^2v}{dt^2}$	$\frac{d^3u}{dt^3} v + 3\frac{d^2u}{dt^2}\frac{dv}{dt} + 3\frac{du}{dt}\frac{d^2v}{dt^2} + u\frac{d^3v}{dt^3}$	1M	3M + 1A	6M + 4A	11M + 7A
$\frac{u}{v}$	$\left(\frac{du}{dt} - w\frac{dv}{dt}\right)\cdot\frac{1}{v}$	$\left(\frac{d^2u}{dt^2} - 2\frac{dw}{dt}\frac{dv}{dt} - w\frac{d^2v}{dt^2}\right)\frac{1}{v}$	$\left(\frac{d^3u}{dt^3} - 3\frac{d^2w}{dt^2}\frac{dv}{dt} - 3\frac{dw}{dt}\frac{d^2v}{dt^2} - w\frac{d^3v}{dt^3}\right)\frac{1}{v}$	1D	1D+3M+1A	1D + 6M + 4A	1D + 11M + 7A
e^u	$w\frac{du}{dt}$	$\frac{dw}{dt}\cdot\frac{du}{dt} + w\frac{d^2u}{dt^2}$	$\frac{d^2w}{dt^2}\cdot\frac{du}{dt} + 2\frac{dw}{dt}\frac{d^2u}{dt^2} + w\frac{d^3u}{dt^3}$	1T	1T + 1M	1T + 3M + 1A	1T + 6M + 4A
$\sin u$ $\cos u$	$\left.\begin{matrix}\cos u \\ -\sin u\end{matrix}\right\}\cdot\frac{du}{dt}$	$-w\left(\frac{du}{dt}\right)^2 + \left\{\begin{matrix}\cos u \\ -\sin u\end{matrix}\right\}\cdot\frac{d^2u}{dt^2}$	$-\left(\frac{dw}{dt}\frac{du}{dt} + 3w\frac{d^2u}{dt^2}\right)\frac{du}{dt} + \left\{\begin{matrix}\cos u \\ -\sin u\end{matrix}\right\}\frac{d^3u}{dt^3}$	1T	2T + 1M	2T + 4M + 1A	2T + 9M + 3A
$\log u$	$\frac{1}{u}\cdot\frac{du}{dt}$	$\left(\frac{d^2u}{dt^2} - \frac{dw}{dt}\cdot\frac{du}{dt}\right)\cdot\frac{1}{u}$	$\left(\frac{d^3u}{dt^3} - 2\frac{d^2w}{dt^2}\frac{du}{dt} - \frac{dw}{dt}\frac{d^2u}{dt^2}\right)\cdot\frac{1}{u}$	1T	1T + 1D	1T+1D+3M+1A	1T+1D+6M+4A
$\sqrt{u}$	$\frac{1}{2w}\cdot\frac{du}{dt}$	$\left(\frac{d^2u}{dt^2} - 2\left(\frac{dw}{dt}\right)^2\right)\frac{1}{2w}$	$\left(\frac{d^3u}{dt^3} - 6\frac{d^2w}{dt^2}\frac{dw}{dt}\right)\cdot\frac{1}{2w}$	1T	1T+1D+1A	1T+1D+2M+3A	1T+1D+5M+4A

A…addition/subtraction, M…multiplication, D…division, T…other operations

4．自動微分法による微係数の計算と手間

端点における微係数 $f^{(k)}$ の自動微分法による計算の概略は次のようなものである[1),2)]．

1）　x から f を計算する過程を2項演算 $w:=u\odot v$ あるいは単項演算 $w:=\odot u$ の列として表わす．x，f および w のところに，x に関する微係数を入れる場所 $D^{(k)}(x)$，$D^{(k)}(f)$，$D^{(k)}(w)$，$(k=1,\cdots)$ を用意する．

2）　微係数の計算のために初期設定として

$$D^{(k)}(x):=\begin{cases}1, & (k=1)\\ 0, & (k\geqq 2)\end{cases}$$

とおく．

x から f を計算する過程を順に辿りながら，関数計算を行っていくと同時に微係数の計算を行う．

例えば掛け算 $w:=u*v$ の場合には次のように計算する．

1階の微係数　$D^{(1)}(w):=v*D^{(1)}(u)+u*D^{(1)}(v)$

2階の微係数　$D^{(2)}(w):=v*D^{(2)}(u)+2*D^{(1)}(u)*D^{(1)}(v)$
$\qquad+u*D^{(2)}(v)$

3階の微係数　$D^{(3)}(w):=v*D^{(3)}(u)+3*D^{(2)}(u)*D^{(1)}(v)$
$\qquad+3*D^{(1)}(u)*D^{(2)}(v)+u*D^{(3)}(v)$

………

基本演算に対する具体的な計算と手間を Table 1 に示す．

5．公式の手間の比較と数値例

自動微分法による微係数を用いる公式 $D^{(k)}_{m,n}$ の計算の手間は次のように見積もることができる．

関数計算に含まれる基本演算の回数を $L(f)$，1回の掛け算の手間を M とすると

$$\begin{array}{l}2k-1 \text{ 次の微係数まで計算} \\ \text{するのに要する余分の手間}\end{array} \leqq 2(k+1)(2k-1)M\cdot L(f)$$

と見積もられる．

また，次のような仮定を置く．

$$\left\{\begin{array}{l}\text{補外の手間}\cdots\cdots\cdots\cdots\text{無視} \\ \text{基本演算}\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\text{すべて乗法}\end{array}\right\} \quad (T_{n,n} \text{ に有利})$$

すると，$2k-1$ 次の微係数まで求めるのに要する余分の手間は

$k=1$ のとき $4M\cdot L(f)$，　$k=2$ のとき $18M\cdot L(f)$

となる．この仮定のもとでの誤差の大きさと手間の比較を Table 2 に示す．

Table 2 の $D^{(k)}_{m,n}$ の欄で下線のあるものが $T_{n,n}$ より手間の少ないものであるが，実際の問題では関数計算は掛け算ばかりではない．その場合，組み込み関数の計算には掛け算よりも手間がかかるから端点における微係数計算の手間の占める割合はもっと少なくなろう．また，誤差の大きさも同じ微係数のところで補外をとどめたところでの比較がこうなるのであって，補外の手続きは $D^{(k)}_{m,m+K}$ まで続けられるから Romberg 積分がうまく働くような積分ならば，そこでの誤差はずっと小さくなる．

数値例として

$\int_0^1 e^{4x}dx$

の同じ刻み幅に対する誤差を Fig. 1に示す．

この例からも $D^{(K)}_{m,m+K}$ は刻み幅が2倍のところで $T_{n,n}$ とほぼ同精度が達成されていることがわかる．

Table 2 Error terms and costs of $T_{n,n}$ and $D^{(k)}_{m,n}$

	$T_{n,n}$			$D^{(1)}_{m,n}$						$D^{(2)}_{m,n}$					
				$m=n$			$m=n-1$			$m=n-1$			$m=n-2$		
$\frac{(2n+2)!\,B_{2n+4}F^{(2n+3)}}{(2n+4)!\,B_{2n+2}F^{(2n+1)}}\times$	$\frac{4}{3}\left(1-\frac{1}{4^{n+1}}\right)$			$\frac{1}{3}\left(1-\frac{1}{4^{n}}\right)$			$\frac{4}{3}\left(1-\frac{1}{4^{n}}\right)$			$\frac{1}{3}\left(1-\frac{1}{4^{n-1}}\right)$			$\frac{4}{3}\left(1-\frac{1}{4^{n-1}}\right)$		
K_{2n+2}	h	C_T	cost	h	$\frac{C_D}{C_T}$	cost	h	$\frac{C_D}{C_T}$	cost	h	$\frac{C_D}{C_T}$	cost	h	$\frac{C_D}{C_T}$	cost
$(b-a)^2\frac{B_2}{2!}(f'(b)-f'(a))$	2^0	1	2												
$(b-a)^4\frac{B_4}{4!}(f^{(3)}(b)-f^{(3)}(a))$	2^{-1}	$\frac{1}{4}$	3	2^{-1}	$\frac{1}{4}$	3 + 4	2^0	4	2 + 4						
$(b-a)^6\frac{B_6}{6!}(f^{(5)}(b)-f^{(5)}(a))$	2^{-2}	$\frac{1}{4^3}$	5	2^{-2}	$\frac{1}{20}$	5 + 4	2^{-1}	$\frac{16}{5}$	3 + 4	2^{-1}	1	3 + 18	2^0	64	2 + 18
$(b-a)^8\frac{B_8}{8!}(f^{(7)}(b)-f^{(7)}(a))$	2^{-3}	$\frac{1}{4^6}$	9	2^{-3}	$\frac{1}{84}$	9 + 4	2^{-2}	$\frac{64}{21}$	5 + 4	2^{-2}	$\frac{4}{21}$	5 + 18	2^{-1}	$\frac{1024}{21}$	3 + 18
$(b-a)^{10}\frac{B_{10}}{10!}(f^{(9)}(b)-f^{(9)}(a))$	2^{-4}	$\frac{1}{4^{10}}$	17	2^{-4}	$\frac{1}{340}$	17 + 4	2^{-3}	$\frac{256}{85}$	9 + 4	2^{-3}	$\frac{16}{357}$	9 + 18	2^{-2}	$\frac{16384}{357}$	5 + 18
$(b-a)^{12}\frac{B_{12}}{12!}(f^{(11)}(b)-f^{(11)}(a))$	2^{-5}	$\frac{1}{4^{15}}$	33	2^{-5}	$\frac{1}{1364}$	33 + 4	2^{-4}	$\frac{1024}{341}$	17 + 4	2^{-4}	$\frac{64}{5797}$	17 + 18	2^{-3}	$\frac{2\,62144}{5797}$	9 + 18
$(b-a)^{14}\frac{B_{14}}{14!}(f^{(13)}(b)-f^{(13)}(a))$	2^{-6}	$\frac{1}{4^{21}}$	65	2^{-6}	$\frac{1}{5460}$	65 + 4	2^{-5}	$\frac{4096}{1365}$	33 + 4	2^{-5}	$\frac{256}{93093}$	33 + 18	2^{-4}	$\frac{41\,94304}{93093}$	17 + 18
$(b-a)^{16}\frac{B_{16}}{16!}(f^{(15)}(b)-f^{(15)}(a))$	2^{-7}	$\frac{1}{4^{28}}$	129	2^{-7}	$\frac{1}{21844}$	129 + 4	2^{-6}	$\frac{16384}{5461}$	65 + 4	2^{-6}	$\frac{1024}{14\,90853}$	65 + 18	2^{-5}	$\frac{671\,08864}{14\,90853}$	33 + 18
					$\Downarrow$ $\frac{3}{4^{n+1}}$			$\Downarrow$ 3_{+0}			$\Downarrow$ $\frac{45}{4^{n+1}}$			$\Downarrow$ 45_{+0}	

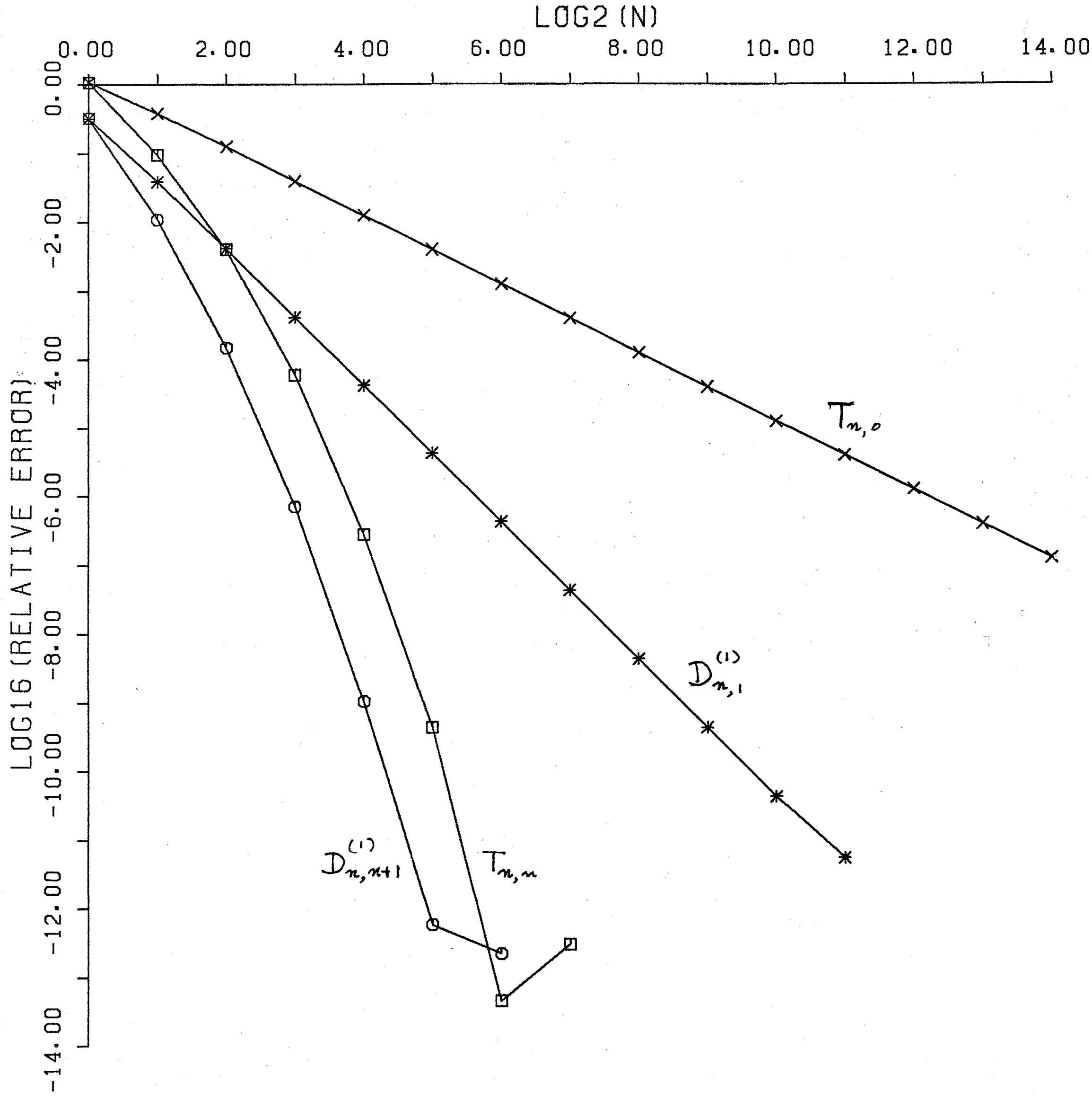

Fig. 1 Relative error in evaluation of $\int_0^1 e^{4x}dx$
(in double precision on FACOM M340S)

6．結論

$D_{m,n}^{(k)}$ は同じ刻み幅に対して $T_{n,n}$ より誤差が小さいから，実際の Romberg 積分では収束判定が早く満たされよう．従って刻み幅が２倍のところで満たされるか，同じ刻み幅のところまでいっても早く抜け出すであろう．この場合，補外にかかる手間は少なくて済むし，端点での微係数計算の手間は積和だけなのに対し，一般に関数計算は乗除だけではないから，計算全体に占める余分な手間の割合は Table 2 よりはずっと少ない．

従って端点での１階の微係数を用いた台形公式は手間の面から推奨される公式といえる．

参考文献

１）Iri, M.：Simultaneous Computation of Functions, Partial Derivatives and Estimates of Rounding Errors — Complexity and Practicality —, Jpn. J. Appl. Math., Vol. 1, Nó. 2, pp. 223-252(1984).

２）Rall, L. B.：Automatic Differentiation— Techniques and Applications, Lecture Notes in Computer Science, Vol. 120, Springer—Verlag, Berlin-Heidelberg-New York (1981).

３）Ralston, A. and Rabinowitz, P.：A First Course in Numerical Analysis (Second Edition), McGraw-Hill, New York (1987) (戸田英雄，小野令美(訳)：電子計算機のための数値解析の理論と応用<上>，ブレイン図書出版，東京(1986))．